Algorithmes efficaces pour tester l'identifiabilité locale

Francois Ollivier, Alexandre Sedoglavic

Algorithmes efficaces pour tester l'identifiabilité locale

François Ollivier[1], Alexandre Sedoglavic[1,2],

[1]Laboratoire GAGE, École polytechnique,
F-91128 Palaiseau, France.
[2]Projet Algorithmes, INRIA – Rocquencourt,
F-78153 Le Chesnay Cedex, France.

{Francois.Ollivier, Alexandre.Sedoglavic}@polytechnique.fr

http://www.medicis.polytechnique.fr/~{ollivier, sedoglav}

Résumé— **Parmi les méthodes utilisées pour tester l'identifiabilité locale d'un système, on peut citer le développement en séries de Taylor des sorties et la méthode des similarités (similarity transformation approach).**

Nous rappelons que les paramètres non identifiables d'un système peuvent être déterminés par un algorithme probabiliste de complexité polynomiale en la taille de l'entrée. Cet algorithme est basé sur la méthode des développements en séries.

Si le modèle considéré est non identifiable, nous montrons que cette méthode permet de calculer des groupes de transformations qui agissent sur les variables non observables et les paramètres non identifiables tout en laissant les entrées, les sorties et les trajectoires du système invariant. Ce calcul permet de certifier et de compléter le résultat précédent.

La méthode des similarités se base sur la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles pour trouver ce groupe. Notre approche ne repose que sur le calcul du noyau d'une matrice à coefficients polynomiaux et l'intégration sous forme close d'un système différentiel ordinaire de petite taille.

Pour conclure, nous présentons quelques exemples qui montrent l'efficacité de notre approche.

Mots-clés— **Observabilité et identifiabilité algébrique locale, algorithmes seminumériques.**

I. Introduction

Tester l'identifiabilité structurelle d'un système est une étape importante dans la validation théorique d'un modèle. Intuitivement, les paramètres d'un système sont identifiables s'il est théoriquement possible de les déterminer à partir des entrées et des sorties supposées parfaitement connues. Par exemple, si on considère le système suivant tiré de [21] :

$$\left\{\begin{array}{l} \dot{u} \neq 0,\ \dot{\theta}_1 = \dot{\theta}_2 = \dot{\theta}_3 = \dot{\theta}_4 = 0, \\ \dot{x}_1 \;=\; \theta_1 {x_1}^2 + \theta_2 x_1 x_2 + u, \\ \dot{x}_2 \;=\; \theta_3 {x_1}^2 + \theta_4 x_1 x_2, \\ y \;=\; x_1. \end{array}\right. \tag{1}$$

Le groupe de transformation $\{x_2, \theta_2, \theta_3\} \rightarrow \{\lambda x_2, \theta_2/\lambda, \lambda\theta_3\}$ laisse invariant le champ de vecteurs, la sortie y et la commande u définies ci-dessus. Ainsi, à un comportement entrée-sortie correspond une infinité de valeurs possibles de la variable x_2 et des paramètres θ_2 et θ_3. Ce système n'est pas identifiable si on ne dispose pas de la condition initiale x_2 ou d'un des deux paramètres.

Publié dans les *Actes de la Conférence Internationale Francophone d'Automatique 2002* (Nantes, France, July 8–10 2002), IEEE, pp. 811–816.

R. Hermann et A.J. Krener ont proposé dans [7] un test reposant sur des calculs de rang de matrice. Parallèlement, H. Pohjanpalo a proposé dans [14] un analogue de ce test à partir de développement en séries pour l'identifiabilité. Dans ces deux cas, l'utilisation du calcul numérique seul pour tester la propriété d'observabilité d'un modèle ne peut être systématique du fait des incertitudes numériques liées à l'utilisation de nombres *flottants*. En effet, les déterminants calculés numériquement peuvent ne pas être significativement supérieurs aux incertitudes de calculs et on ne peut dans ce cas décider s'ils sont nuls ou pas.

Des méthodes symboliques d'élimination ont été utilisées par Y. Lecourtier, A. Raksanyi et É. Walter [16] pour tester l'identifiabilité. Par ailleurs, l'algèbre différentielle initiée par J.F. Ritt [17] donne une expression simple de l'observabilité et de l'identifiabilité en terme de dépendance algébrique. Ce point de vue, notamment initié par S. Diop et M. Fliess [4] d'une part et T. Glad et L. Ljung [11] d'autre part, débouche sur une méthode de test effectif basée sur les travaux de F. Boulier et al. [2]. Ces méthodes algébriques permettent de conclure de manière certaine à l'identifiabilité d'un système mais nécessitent des calculs complexes qui peuvent devenir rapidement impraticables (cf. [12] pour l'utilisation de ces méthodes pour l'identification et plus de précisions).

Pour circonvenir ces difficultés calculatoires, nous nous proposons d'utiliser des algorithmes tirant profit des approches numériques et symboliques. Nous qualifions ces algorithmes de *seminumériques* pour reprendre l'expression de D. Knuth [9] (*[...] they are properly called* seminumerical, *because they lie on the borderline between numeric and symbolic calculation*). Parmi les travaux consacrés à ce type d'approche, on peut citer [3], [13] et [20]. La présente note se base sur cette dernière contribution pour présenter une méthode seminumérique permettant *dans la majorité des cas* de déterminer un groupe continu de transformations dont il a été question ci-dessus. Cette méthode permet de traiter des systèmes inaccessibles jusqu'à présent aux autres méthodes.

Nous consacrerons la première section à présenter les résultats contenus dans cette note en donnant un exemple concret et un résultat de complexité. Puis nous introduirons le formalisme d'algèbre différentielle utilisé et nous indiquerons comment il prolonge certains résultats existants. Dans la dernière section, nous introduisons une méthode, à notre connaissance nouvelle, permettant de déterminer un groupe continu d'automorphismes agissant sur les variables et les paramètres non observables d'un modèle qui laissent ses trajectoires et ses sorties invariantes.

Remarque 1: Par abus de langage, nous écrirons parfois qu'un paramètre est observable s'il est identifiable ; ce parti pris simplifie grandement la présentation des résultats de cette note sans pour autant nuire à leur rigueur.

A. Modèles considérés, représentations et notations

Nous considérons dans la suite des modèles définis par une représentation d'état algébrique du type :

$$\Sigma \quad \left\{ \begin{array}{lcl} \dot{\Theta} & = & 0, \quad \dot{U} \neq 0, \\ \dot{X} & = & F(X, \Theta, U), \\ Y & = & H(X, \Theta, U). \end{array} \right. \tag{2}$$

où les lettres majuscules représentent des vecteurs et où F et H dénotent des fractions rationnelles dans $\mathbb{Q}(X, \Theta, U)$. En rajoutant des indéterminés et des relations algébriques, on peut inclure dans cette classe de modèles les systèmes faisant intervenir des fonctions transcendantes usuelles (exp, sin, log, etc).

De plus, nous supposons que les fractions F et G sont représentées par un *calcul d'évaluation* qui est de complexité L. Il s'agit d'un codage classique en analyse numérique mais relativement peu utilisé dans le cadre du calcul symbolique. L'expression $e := x^5$ est représentée par la suite d'instructions : $t_1 := x,\ t_2 := {t_1}^2,\ t_3 := {t_2}^2$, $e := t_3 t_1$ et L vaut ici 3. Nous supposons qu'il n'y a pas de conditionnelles (i.e. fonction de Dirac, etc.) dans ces instructions.

La *taille* d'un système correspond à sa complexité d'évaluation et aux mesures habituelles comme le degré maximum d des expressions algébriques et la taille h des scalaires intervenant dans ces expressions (i.e. leurs nombres de décimal). De plus, nous supposons qu'il y a :

$$\begin{array}{llcl} \ell \text{ paramètres} & \Theta & = & (\theta_1, \ldots, \theta_\ell), \\ n \text{ variables d'état} & X & = & (x_1, \ldots, x_n), \\ r \text{ commandes} & U & = & (u_1, \ldots, u_r), \\ \text{et } m \text{ sorties} & Y & = & (y_1, \ldots, y_m). \end{array}$$

B. Exemple et sorties des algorithmes.

Le système d'équations suivant est utilisé par A. Goldbeter dans [6] comme modèle du rythme circardien de production d'une protéine chez la drosophile. Il comporte 17 paramètres, 5 variables d'état et une sortie.

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \dot{M} & = & \frac{v_s {K_I}^4}{{K_I}^4 + {P_N}^4} - \frac{v_m M}{K_m + M}, \\ \dot{P}_0 & = & k_s M - \frac{V_1 P_0}{K_1 + P_0} + \frac{V_2 P_1}{K_2 + P_1}, \\ \dot{P}_1 & = & \frac{V_1 P_0}{K_1 + P_0} + \frac{V_4 P_2}{K_4 + P_2} - P_1 \Big(\frac{V_2}{K_2 + P_1} + \frac{V_3}{K_3 + P_1} \Big), \\ \dot{P}_2 & = & \frac{V_3 P_1}{K_3 + P_1} - P_2 \Big(\frac{V_4}{K_4 + P_2} + k_1 + \frac{v_d}{K_d + P_2} \Big) + k_2 P_N, \\ \dot{P}_N & = & k_1 P_2 - k_2 P_N, \\ y & = & P_N. \end{array} \right. \tag{3}$$

Les algorithmes présentés dans cette note prennent en entrée ce type de système et renvoient en sortie les informations suivantes :

- la variable M et les paramètres $\{v_s,\, v_m,\, K_m,\, k_s\}$ ne sont pas observables. Les autres paramètres et variables sont observables ;
- si M ou un seul des paramètres non observables était connu, alors le modèle serait observable ;
- il existe un groupe de transformation à un paramètre λ qui agit sur $\{M,\, v_s,\, v_m,\, K_m,\, k_s\}$ et laisse la sortie et les trajectoires du système invariantes. Dans notre exemple, on a :

$$\sigma_\lambda : \{M,\, v_s,\, v_m,\, K_m,\, k_s\} \rightarrow \{\lambda M,\, \lambda v_s,\, \lambda v_m,\, \lambda K_m,\, k_s/\lambda\}.$$

Ces résultats certifient que la connaissance des différentes protéines P_0, P_1, P_2, P_N — ou d'une somme quelconque de ces protéines — ne permet pas de déterminer les variables et paramètres non observables.

Un prototype de l'algorithme présenté a été implanté dans le système de calcul formel Maple et est disponible à l'URL [18]. Les temps de calculs nécessaires pour obtenir ces résultats sont de l'ordre de la minute (sur un PC Pentium III (650 MHz) avec 128 Mb de mémoire vive) et on a le résultat de complexité suivant.

C. Résultat de complexité

Avec les notations présentées dans la section I-A, on a :

Théorème 1 ([20]) *Il existe un algorithme probabiliste qui distingue l'ensemble des variables observables d'un modèle. De plus, il indique le nombre de variables non observables devant être supposées connues pour obtenir un modèle observable. La complexité arithmétique de cet algorithme est bornée par*

$$\mathcal{O}\Big(\mathcal{M}(\nu)\big(\mathcal{N}(n+\ell) + (n+m)L\big) + m\nu\mathcal{M}(n+\ell)\Big)$$

avec $\mathcal{M}(\nu)$ (resp. $\mathcal{N}(\nu)$), le coût de la multiplication de deux séries à l'ordre $\nu + 1$ (resp. de deux matrices de taille $\nu \times \nu$) et ν inférieur ou égal à $n + \ell$ (génériquement ν est égal à $(n + \ell)/m$). Soient μ un entier positif arbitraire, $D := 4(n + \ell)^2(n + m)d$ et

$$D' := \Big(2\ln(n+\ell+r+1) + \ln\mu D\Big) D + 4(n+\ell)^2 \Big((n+m)h + \ln 2nD\Big).$$

Si les calculs sont effectués modulo un nombre premier p supérieur à $2D'\mu$ alors la probabilité d'obtenir une réponse correcte est minorée par $(1 - 1/\mu)^2$.

Ce théorème a été présenté récemment dans la publication [20] ; il est à la base de la méthode que nous présentons dans la suite et qui permet de déterminer les symétries d'un modèle et agissant sur les variables et paramètres non observables de celui-ci.

II. Algèbre différentielle et observabilité

L'algèbre différentielle, issue des travaux de J.F. Ritt [17] et de E.R. Kolchin [10], peut être considérée comme une généralisation aux équations différentielles des concepts et outils de l'algèbre commutative et de la géométrie algébrique. Pour ce faire, on complète les structures algébriques classiques par une dérivation. Par exemple, supposant que toutes les commandes U sont différentiellement algébriquement indépendantes, l'on note $k\langle U\rangle$ le corps différentiel constitué des commandes et de leurs dérivées formelles ; il s'agit simplement du corps $k(U, \dot{U}, \ldots)$ à une infinité d'indéterminés.

De plus, la donnée du champ de vecteurs du modèle Σ revient à définir la dérivation de Lie :

$$\mathcal{L} := \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} f_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{j\in\mathbb{N}} \sum_{u\in U} u^{(j+1)} \frac{\partial}{\partial u^{(j)}}. \qquad (4)$$

Dans ce cadre théorique, on peut associer au modèle Σ le corps différentiel $k\langle U\rangle(X, \Theta)$ munit de la dérivation $\mathcal{L}$. Dans la suite, ce corps est noté $\mathcal{K}$ et on a $\mathcal{L}^j = \underbrace{\mathcal{L} \circ \ldots \circ \mathcal{L}}_{j \text{ fois}}$.

Remarquons que le corps $k\langle U, Y\rangle$ (où Y représente les sorties du modèle Σ) est un sous-corps différentiel de $\mathcal{K}$. Les dérivées $Y^{(j)}$ d'ordre j des sorties sont donc représentées par les expressions $\mathcal{L}^j H$ dans $\mathcal{K}$.

A. Définition, linéarisation et méthode de calcul

Dans le cadre théorique présenté ci-dessus, la notion d'observabilité algébrique locale peut être définie intrinsèquement de la manière suivante :

Définitions 1 ([11], [4]) *Soient $\mathcal{K}$ un corps différentiel associé au modèle Σ, Y une sortie et U une commande de ce système.*

– *Un élément η du corps $\mathcal{K}$ est localement* observable *en fonction de Y et U si, et seulement si, cet élément est (non différentiellement) algébrique sur $k\langle U, Y\rangle$.*
– *Le modèle Σ est localement observable en fonction de Y et U si, et seulement si, le corps différentiel $\mathcal{K}$ est algébrique sur $k\langle U, Y\rangle$.*

Nous considérons maintenant l'analogue algébrique de la *linéarisation* en géométrie différentielle. Pour ce faire, notons qu'on peut associer à toute extension de corps T/S les T-espaces vectoriels suivants :

– l'espace des dérivations $\mathrm{Der}_S(T, T)$, composé des dérivations de T dans T dont le corps de constantes est S ($\partial : T \to T$, tel que $\forall c \in S,\ \partial c = 0$) ;
– l'espace des différentielles de Kähler $\Omega_{T/S}$ qui peut être défini par la propriété suivante : il existe une dérivation surjective d de T dans $\Omega_{T/S}$ telle que pour toute dérivation ∂ dans le T-espace vectoriel $\mathrm{Der}_S(T,\, T)$, il existe un unique homomorphisme linéaire δ de $\Omega_{T/S}$ dans T tel que $\delta(\mathrm{d}z) = \partial z$.

Nous renvoyons le lecteur intéressé à la lecture du chapitre 16 de [5] pour un exposé complet. Ces notions se généralisent dans le cadre différentiel et nous renvoyons à [10] et [8] pour plus de détails. On peut représenter effectivement le module $\Omega_{\mathcal{K}/k\langle U,Y\rangle}$. Dans notre cas, il s'agit du conoyau de la matrice jacobienne :

$$\frac{\partial\big(Y^{(i)}\big)_{0\le i\le \nu}}{\partial(X,\Theta)} = \left(\frac{\partial {h_{i_1}}^{(i_2)}}{\partial x_{i_3}}\ \frac{\partial {h_{i_1}}^{(i_2)}}{\partial \theta_{i_4}}\right)_{\substack{1\le i_1\le m,\ 0\le i_2\le \mu,\\ 1\le i_3\le n,\ 1\le i_4\le \ell.}} \qquad (5)$$

De même, le $\mathcal{K}$-espace vectoriel $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\, \mathcal{K})$ est représenté par le noyau de cette matrice. Plus précisément, cet espace est engendré par les solutions du système linéaire $\partial\big(Y^{(i)}\big)/\partial(X,\Theta)\,\mathcal{D} = 0$ avec $\mathcal{D}$ le vecteur de dérivations $(\partial/\partial x_1, \ldots, \partial/\partial x_n, \partial/\partial\theta_1, \ldots, \partial/\partial\theta_\ell)$.

Pour déterminer l'observabilité, nous utilisons principalement la propriété classique suivante :

Théorème 2 (§ 16 dans [5]) *Considérons S un corps de caractéristique zéro, T une extension de S finiment engendrée et $\{x_\lambda\}$ un ensemble d'éléments dans T. L'ensemble $\{\mathrm{d}x_\lambda\}$ est une base du T-espace vectoriel $\Omega_{T/S}$ si, et seulement si, l'ensemble $\{x_\lambda\}$ forme une base de transcendance de T sur S.*

En effet, ce théorème et la définition 1 permettent d'exprimer la propriété d'observabilité en termes de calcul de rang portant sur la matrice (5). On a par exemple :

Corollaire 1: Le degré de transcendance algébrique de l'extension de corps $\mathcal{K}/k\langle U,\, Y\rangle$ est égal à

$$(n+\ell) - \mathrm{Rang}\ \frac{\partial\big(Y^{(i)}\big)_{0\le i\le\nu}}{\partial(X,\Theta)}. \qquad (6)$$

Le degré de transcendance de cette extension de corps est égal à la dimension du $\mathcal{K}$-espace vectoriel $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\, \mathcal{K})$.

Nous pouvons statuer sur l'observabilité d'une variable d'état $\bar{x}$ (ou d'un paramètre) seul par la même méthode. En effet, en utilisant des modules de Kähler, nous pouvons calculer le degré de transcendance des extensions $\mathcal{K}/k\langle U,\, Y\rangle$ et $\mathcal{K}/k\langle U,\, Y,\, \bar{x}\rangle$. Le degré de transcendance de $k\langle U,\, Y,\, \bar{x}\rangle/k\langle U,\, Y\rangle$ s'en déduit immédiatement par soustraction ; la variable $\bar{x}$ est observable si, et seulement si, ce degré est nul.

B. Intérêt de ce formalisme

Les notions présentées ci-dessus permettent une formalisation algébrique d'un point de vue classique que l'on trouve notamment dans les travaux [7] et [14]. Mais ce formalisme permet d'aller au delà de ce point de vue.

Pour commencer, remarquons que dans les approches citées ci-dessus, il n'y a pas de borne sur l'ordre de dérivation nécessaire pour construire la matrice $\partial\big(Y^{(i)}\big)/\partial(X,\Theta)$ et mener à bien les calculs. En adoptant le point de vue présenté ici, on peut montrer que cet ordre ν est génériquement égal à $\lfloor(\ell+n)/m\rfloor$ et borné par $\ell + n$ (cf. proposition 1 dans [20]).

Dans cette même publication, on montre dans la section 3 comment calculer le rang générique de la matrice $\partial\big(Y^{(i)}\big)/\partial(X,\Theta)$ en n'utilisant que des opérations élémentaires sur un corps fini. Ainsi, contrairement aux méthodes basées sur la résolution symbolique d'équations algébriques, cette méthode permet — à l'instar des méthodes numériques — de ne manipuler que des objets de taille réduite tout en contrôlant la complexité arithmétique (notons tout de même que les méthodes symboliques permettent de répondre à l'observabilité globale alors que notre méthode est locale).

De plus, l'utilisation de calculs symboliques sur un corps fini permet — à l'instar des méthodes symboliques — de décider avec une grande probabilité de succès de l'observabilité locale d'un modèle. En effet, il n'y a pas dans ce cadre de perte de précision due à l'utilisation d'une arithmétique flottante.

Ces quelques points sont regroupés et précisés dans l'énoncé du théorème 1. Nous montrons dans la section suivante comment utiliser le formalisme de l'algèbre différentielle pour calculer certains groupes de transformation associés à des modèles non observables.

III. Groupe continu de transformations

On associe à un système Σ sous forme de représentation d'état (2), l'extension de corps $\mathcal{K}/k\langle U,Y\rangle$ décrite dans la section II.

Définition 1: Un groupe σ_λ de $\mathcal{K}$-automorphismes indexés par λ qui laisse le corps $k\langle U,Y\rangle$ ponctuellement invariant est tel que :
- *le paramètre λ du groupe est une constante $(\dot{\lambda}=0)$;*
- *σ_1 est l'identité et on a $\sigma_{\lambda\mu}(\cdot)=\sigma_\lambda(\sigma_\mu(\cdot))$;*
- *σ_λ est un automorphisme différentiel ($\sigma_\lambda\circ\mathcal{L}=\mathcal{L}\circ\sigma_\lambda$) et, pour tout (a,b) dans $\mathcal{K}^2$ et tout c dans $k\langle U,Y\rangle$, on a les propriétés suivantes :*

$$\sigma_\lambda(c) = c, \tag{7}$$
$$\sigma_\lambda(ca) = c\sigma_\lambda(a), \tag{8}$$
$$\sigma_\lambda(a+b) = \sigma_\lambda(a)+\sigma_\lambda(b), \tag{9}$$
$$\sigma_\lambda(ab) = \sigma_\lambda(a)\sigma_\lambda(b). \tag{10}$$

À ce point de vue algébrique, on peut associer l'interprétation géométrique suivante. Considérons l'espace $\mathcal{E}$ de coordonnées (x_1, x_2, θ_2, θ_3, θ_4, u, τ) associé à l'exemple (1) et muni d'une dérivation telle que $\dot{\tau}=1$. Une trajectoire du modèle (1) correspond à une solution du système (1) paramétrisée par u et τ. Le groupe d'automorphismes σ_λ définit un groupe continu de transformation de $\mathcal{E}$ tel que les trajectoires, les entrées et les sorties du système sont invariantes par ces transformations (voir [21] pour plus de détails et une autre méthode de calcul basée sur la résolution d'équations aux dérivées partielles).

Remarque 2: Si un élément a du corps $\mathcal{K}$ est algébrique sur $k\langle U,Y\rangle$ alors $\sigma_\lambda(a)$ est aussi algébrique sur $k\langle U,Y\rangle$ et possède le même polynôme minimal. Ainsi, il n'y a qu'un nombre fini d'actions possibles de σ_λ sur a correspondant aux racines du polynôme minimal de cet élément. Donc, si l'extension de corps $\mathcal{K}/k\langle U,Y\rangle$ est purement algébrique, il n'y a pas de groupe infini de $\mathcal{K}$-automorphismes agissant sur $\mathcal{K}$ et laissant $k\langle U,Y\rangle$ ponctuellement invariant. Cette remarque montre que, s'il est possible d'exhiber un tel groupe, alors on certifie que le modèle est non observable. De plus, ce groupe fournit des informations supplémentaires sur les relations entre les quantités non observables.

A. Dérivation associée à un groupe d'automorphismes.

L'expression σ_λ peut être considérée comme une application d'un corps des constantes dans un ensemble d'automorphismes. Ainsi, il est possible de considérer l'application suivante :

$$\partial = \left.\frac{\partial\sigma_{1+\lambda}}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=0} \quad : \quad k\langle U,Y\rangle(X,\Theta)\to k\langle U,Y\rangle(X,\Theta).$$

Par construction de σ_λ, on a :
- la propriété (7) implique que pour tout c dans $\bar{k}$, $\partial(c)$ est égal à zéro ;
- les propriétés (8) et (9) impliquent que ∂ est $k\langle U,Y\rangle$-linéaire ;
- la propriété (10) implique que ∂ satisfait aux règles de Leibniz.

Ainsi, cette application ∂ associée au groupe continu d'automorphismes σ_λ est une dérivation dans $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$. Pour le modèle (1), on a :

$$\partial = x_2\frac{\partial}{\partial x_2}-\theta_2\frac{\partial}{\partial\theta_2}+\theta_3\frac{\partial}{\partial\theta_3},$$

lorsque $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$ est considéré comme un sous-espace du $\mathcal{K}$-espace vectoriel engendré par les dérivations canoniques $\partial/\partial x_1$, …, $\partial/\partial x_n$, $\partial/\partial\theta_1,\ldots,\partial/\partial\theta_\ell$. Remarquons que cette dérivation définit une symétrie du modèle, en effet elle commute avec la dérivation de Lie $\mathcal{L}$ (4) associée au modèle (1) ($[\mathcal{L},\partial]=0$). Contrairement à l'approche développée dans [21], nous n'utilisons pas cette propriété pour calculer les dérivations associées car cela nécessite la résolution d'équations aux dérivées partielles.

Nous allons en fait considérer la situation inverse de celle présentée dans cette section. Si le modèle est non observable, La matrice $\partial(Y^{(i)})/\partial(X,\Theta)$ permet de calculer des générateurs de $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$. Nous allons montrer comment déterminer à partir de ces dérivations un groupe continu d'automorphismes agissant sur les variables et les paramètres non observables d'un modèle et qui laissent ses trajectoires et ses sorties invariantes.

B. Représentation de $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$

Nous considérons un modèle Σ du type (2) et nous lui associons un corps $\mathcal{K}$ et un $\mathcal{K}$-espace vectoriel $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$. Cet espace vectoriel est représenté par le noyau de la matrice $\partial(Y^{(i)})/\partial(X,\Theta)$. Pour calculer cette matrice, on utilise la matrice jacobienne $\partial Y/\partial(X,\Theta)$ à coefficients des séries dans $\mathbb{Q}(X,\Theta,U)[[t]]$ tronquées à l'ordre ν. En effet, si on note Φ la solution formelle dans $\mathbb{Q}(X,\Theta,U)[[t]]$ de l'équation $\dot{X}=F(X,\Theta,U)$, on a la relation :

$$\frac{\partial(Y^{(j)})_{0\le j\le\nu}}{\partial(X,\Theta)} = \mathrm{coeff}\left(\frac{\partial Y}{\partial(X,\Theta)}\left(\Phi,\frac{\partial\Phi}{\partial X},\frac{\partial\Phi}{\partial\Theta}\right),t^j\right)_{0\le j\le\nu}. \tag{11}$$

Il nous faut maintenant calculer les séries Φ, $\Gamma:=\partial\Phi/\partial X$ et $\Lambda:=\partial\Phi/\partial\Theta$. Si on note $P(\dot{X},X,\Theta,U)=0$, le numérateur de la relation $\dot{X}-F(X,\Theta,U)=0$. Le système variationnel linéaire d'équations différentielles suivant :

$$\left\{\begin{array}{c} P(\dot{X},X,\Theta,U),\\ \frac{\partial P}{\partial \dot{X}}\Big(X,\Theta,U\Big)\dot{\Gamma}+\frac{\partial P}{\partial X}\Big(\dot{X},X,\Theta,U\Big)\Gamma,\\ \frac{\partial P}{\partial \dot{X}}\Big(X,\Theta,U\Big)\dot{\Lambda}+\frac{\partial P}{\partial X}\Big(\dot{X},X,\Theta,U\Big)\Lambda+\frac{\partial P}{\partial\Theta}\Big(\dot{X},X,\Theta,U\Big), \end{array}\right. \tag{12}$$

permet de déterminer ces quantités à l'aide d'un opérateur de Newton. Ce calcul nécessite un nombre d'opérations arithmétiques dans $\mathbb{Q}(X,\Theta,U)$ polynomial en la taille de l'entrée (cf. [20] pour un exposé complet). En spécialisant génériquement les indéterminés X, Θ et U, on calcule une spécialisation générique de la matrice $\partial(Y^{(i)})/\partial(X,\Theta)$.

Nous allons utiliser cette propriété en deux temps pour déterminer un générateur de $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$. Tous les calculs présentés dans cette section sont réalisables dans la plupart des systèmes de calcul formel.
- Par des calculs de rang sur $\mathbb{Q}$ ou sur un corps fini, on détermine les variables observables $x_\alpha,\ldots,x_n$ et les paramètres identifiables $\theta_\beta,\ldots,\theta_\ell$ (après renumérotation). Ainsi, la première extension de corps

de la tour d'extension

$$k\langle U,Y\rangle \xhookrightarrow{(1)} k\langle U,Y\rangle(x_\alpha,\ldots,x_n,\theta_\beta,\ldots,\theta_\ell) \xhookrightarrow{(2)} \mathcal{K} \quad (13)$$

est purement algébrique alors que la seconde extension de corps est transcendante. Nous pouvons calculer le degré de transcendance de cette dernière extension en temps polynomial (cf. [20] pour un exposé complet).

– Pour simplifier les calculs, on peut spécialiser génériquement les paramètres identifiables et les conditions initiales des variables observables sur des rationnels et les commandes sur des séries d'ordre ν à coefficients rationnels. En effet, nous avons vu dans la remarque 2 que ces quantités restent ponctuellement invariantes sous l'action du groupe que nous cherchons à déterminer ; elle n'interviennent donc pas dans notre calcul.

Notons que les paramètres non identifiables et les variables non observables ne sont pas spécialisés. Nous pouvons ainsi reprendre dans ces conditions l'étape précédente et calculer une spécialisation de la matrice $\partial(Y^{(i)})/\partial(X,\Theta)$; cette matrice est à coefficients dans $\mathbb{Q}(x_1,\ldots,x_{\alpha-1},\theta_1,\ldots,\theta_{\beta-1})$. Elle décrit le module des dérivations associé à la seconde extension de corps dans la tour (13). Une élimination gaussienne sur cette matrice singulière permet de calculer les générateurs recherchés.

Il s'agit là d'une simplification pouvant être importante. Dans le cas de l'exemple (3) le problème de départ contient 17 paramètres et 5 variables d'état. L'étude préalable de ce système grâce à l'algorithme associé au théorème 1 permet de ne considérer que 4 paramètres et une variable d'état. Ainsi, dans cet exemple, les calculs matriciels sont fait dans le corps de base $\mathbb{Q}(M,v_s,v_m,K_m,k_s)$ et permettent de montrer que la dérivation suivante

$$M\frac{\partial}{\partial M}+v_s\frac{\partial}{\partial v_s}+v_m\frac{\partial}{\partial v_m}+K_m\frac{\partial}{\partial K_m}-k_m\frac{\partial}{\partial k_m} \quad (14)$$

est un générateurs de l'espace vectoriel $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$.

Remarque 3: Pour le modèle (3), la construction de la matrice prend une minute mais il ne nous a pas été possible de calculer le noyau par un simple pivot de Gauss. La complexité de cette seconde partie du calcul n'est pas polynomiale en la taille de l'entrée. C'est le principal facteur bloquant du calcul et il peut être nécessaire d'utiliser des méthodes d'interpolations plus sophistiquées pour calculer le noyau de la matrice $\partial(Y^{(i)})/\partial(X,\Theta)$.

C. Automorphismes associés à une dérivation

Pour simplifier la présentation, nous supposons dans la suite que l'espace vectoriel $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$ est de dimension 1 et que l'on dispose explicitement d'un générateur noté ∂. Dans cette situation, considérons l'application suivante :

$$\begin{array}{rccc} \mathrm{e}^{\tau\partial} : & \mathcal{K} & \rightarrow & \mathcal{K}[[\tau]] \\ & \eta & \rightarrow & \sum_{i\in\mathbb{N}}\partial^i(\eta)\,\tau^i/i!. \end{array}$$

Par construction, l'application σ_λ, où $\lambda=\exp(\tau)$ est un morphisme du corps $\mathcal{K}$ dans le corps des séries en τ inversibles et à coefficients dans $\mathcal{K}$. Nous allons considérer trois cas.

Si la dérivation ∂ est localement nilpotente, alors la somme ci-dessus est finie et, pour tout τ, l'application $\sigma_\lambda(\tau)$ est un automorphisme du corps $\mathcal{K}$. Cette situation n'est pas générique et est relativement exceptionnelle en pratique. Nous ne considérerons donc pas plus avant ce cas.

Si la dérivation ∂ est telle que $\partial(x_i)=\pm\,x_i$ pour i compris entre 1 et α et $\partial(\theta_i)=\pm\,\theta_i$ pour i compris entre 1 et β, alors on a $\sigma_\lambda(x_i)=x_i\,\lambda^{\pm1}$. Ainsi, l'application σ_λ est un morphisme de $\mathcal{K}$ dans $\mathcal{K}(\lambda)$ et définit un groupe continu à un paramètre d'automorphismes. Dans le cas de la dérivation (14), on obtient le groupe

$$\sigma_\lambda : \{M,\,v_s,\,v_m,\,K_m,\,k_s\}\rightarrow\{\lambda M,\,\lambda v_s,\,\lambda v_m,\,\lambda K_m,\,k_s/\lambda\}.$$

Cette situation est la plus courante en pratique mais le modèle de pharmacocinétique suivant montre que nous avons à considérer d'autres cas.

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dot{x}_1 &=& u-(c_1+c_2)x_1,\\ \dot{x}_2 &=& c_1x_1-(c_3+c_6+c_7)x_2+c_5x_4,\\ \dot{x}_3 &=& c_2x_1+c_3x_2-c_4x_3,\\ \dot{x}_4 &=& c_6x_2-c_5x_4,\\ y_1 &=& c_8x_3,\\ y_2 &=& c_9x_2. \end{array}\right. \quad (15)$$

Cet exemple est tiré de [15] et la lettre u représente une commande. Notre implantation en maple fournit les résultats suivants :

– les paramètres $\{c_1,\,c_2,\,c_3,\,c_7,\,c_8,\,c_9\}$ ainsi que les variables $\{x_2,\,x_3,\,x_4\}$ ne sont pas observables ;
– le degré de transcendance de l'extension de corps associée au modèle (15) est égal à 1.

De plus, le groupe continu à un paramètre λ suivant :

$$\sigma_\lambda \;:\; \left\{\begin{array}{ccc} x_2 & \rightarrow & \lambda x_2,\\ x_3 & \rightarrow & ((1-\lambda)c_1+c_2)x_3/c_2,\\ x_4 & \rightarrow & \lambda x_4,\\ c_1 & \rightarrow & \lambda c_1,\\ c_2 & \rightarrow & (1-\lambda)c_1+c_2,\\ c_3 & \rightarrow & \big((1-\lambda)c_1+c_2\big)c_3/\lambda c_2,\\ c_7 & \rightarrow & c_7-c_3(c_1+c_2)(1-\lambda)/\lambda c_2,\\ c_8 & \rightarrow & c_8c_2/\big((1-\lambda)c_1+c_2\big),\\ c_9 & \rightarrow & c_9/\lambda, \end{array}\right. \quad (16)$$

est composé de symétries qui laissent l'entrée, les sorties et les trajectoires du système invariantes. Le temps de calcul nécessaire est de l'ordre de la minute et d'autres exemples sont présentés dans [19].

La méthode présentée dans la section III-B permet de montrer en quelques secondes que la dérivation ∂ suivante

$$\begin{array}{c} c_1c_2\left(\frac{\partial}{\partial c_1}-\frac{\partial}{\partial c_2}\right)-c_3(c_1+c_2)\left(\frac{\partial}{\partial c_3}-\frac{\partial}{\partial c_7}\right)+c_1c_8\frac{\partial}{\partial c_8}\\ -c_9c_2\frac{\partial}{\partial c_9}+x_2c_2\frac{\partial}{\partial x_2}-x_3c_1\frac{\partial}{\partial x_3}+x_4c_2\frac{\partial}{\partial x_4} \end{array}$$

est un générateur du $\mathcal{K}$-espace vectoriel $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$ associé au modèle (15). Mais cette fois, nous ne pouvons pas lui associer directement un groupe d'automorphismes.

Pour ce faire, nous allons considérer la dérivation $\bar{\partial}$ égale à ∂/c_2. Remarquons que cette dérivation est aussi un générateur de $\mathrm{Der}_{k\langle U,Y\rangle}(\mathcal{K},\mathcal{K})$ et que, en utilisant les notations précédentes, on a $\bar{\partial}c_1=c_1\lambda$. Nous allons maintenant montrer que, génériquement, l'application σ_λ définit bien un morphisme de $\mathcal{K}$ dans $\mathcal{K}(\lambda)$ et donc un groupe continu à un paramètre d'automorphismes.

Rappelons que nous avons supposé pour simplifier notre propos que la seconde extension de corps (2) de la tour (13) est de degré de transcendance 1. Donc, les variables non observables et les paramètres non identifiables sont algébriques sur le corps $k\langle u, y_1, y_2\rangle(c_1)$. Ainsi, puisque σ_λ n'agit pas sur $k\langle u, y_1, y_2\rangle$, il existe pour c_2, par exemple, un polynôme P tel que $P\big(\sigma_\lambda(c_2), \sigma_\lambda(c_1)\big) = 0$. Il n'est pas vrai en général que $\sigma_\lambda(c_2)$ soit dans $\mathcal{K}(\lambda)$. C'est cependant le cas le plus fréquent en pratique, au point que nous n'avons pas encore trouvé de contre-exemple dans nos applications.

Il nous reste à présent à montrer comment calculer le groupe continu d'automorphismes σ_λ.

Pour ce faire, nous allons utiliser le champ de vecteurs associé à la dérivation $\bar{\partial}$ définie par les équations :

$$\left\{\begin{array}{lcl} \dot{c}_1(\tau) &=& c_1(\tau),\\ \dot{c}_2(\tau) &=& -c_1(\tau),\\ \dot{c}_3(\tau) &=& -c_3(\tau)\big(c_1(\tau)+c_2(\tau)\big)/c_2(\tau),\\ \dot{c}_7(\tau) &=& c_3(\tau)\big(c_1(\tau)+c_2(\tau)\big)/c_2(\tau),\\ \dot{c}_8(\tau) &=& c_1(\tau)c_8(\tau)/c_2(\tau),\\ \dot{c}_9(\tau) &=& -c_9(\tau),\\ \dot{x}_2(\tau) &=& x_2(\tau),\\ \dot{x}_3(\tau) &=& x_3(\tau)c_1(\tau)/c_2(\tau),\\ \dot{x}_4(\tau) &=& x_4(\tau) \end{array}\right. \tag{17}$$

et les approximants de Hermite – Padé définis dans le théorème suivant :

Théorème 3 ([1]) *Considérons les séries $s_1, \dots, s_i$ dans le corps $\mathcal{K}[[\tau]]$ des séries formelles univariées en τ et à coefficients dans $\mathcal{K}$. Les polynômes $p_1, \dots, p_i$ de degrés $d_1, \dots, d_i$ en τ sont des approximants de Hermite – Padé de $s_1, \dots, s_i$ du type $d_1, \dots, d_i$ si, et seulement si, on a*

$$p_1 s_1 + \cdots + p_i s_i = \mathcal{O}\big(\tau^{d_1+\cdots+d_i+i-1}\big).$$

La complexité arithmétique du calcul de ces approximants est dans $\mathcal{O}\big(i(d_1+\cdots+d_i)^2\big)$.

En utilisant l'algorithme de Newton avec les conditions initiales $c_i(0) = c_i$ et $x_i(0) = x_i$, nous pouvons calculer des séries solutions — dans $\mathbb{Q}(c_1, c_2, c_3, c_7, c_8, c_9, x_2, x_3, x_4)[[\tau]]$ — du système (17) tronquées jusqu'à l'ordre $n + \ell + 5$. Ceci fait, on utilise l'algorithme associé au théorème 3, pour déterminer des constantes $p_1, \dots, p_4$ qui sont des approximants de Hermite – Padé des séries $1, c_i(\tau), \lambda(\tau), \lambda(\tau)c_i(\tau)$ avec $\lambda(\tau)$ égal à $\exp(\tau)$. Puisque les séries $c_i(\tau)$ sont les images de $\sigma_\lambda(c_i)$, on calcule ainsi les fractions rationnelles (16).

Par exemple, à partir du théorème 3 et du calcul des séries solutions du système 17, on détermine la relation $c_2 e^{\tau\partial}(x_3)/x_3 - (c_1 + c_2) + c_1 \exp(\tau) = 0$ qui permet de montre que l'image de $e^{\tau\partial}(x_3)$ est $\big((1-\lambda)c_1 + c_2\big)x_3/c_2$.

Encore une fois, cette méthode n'est valable que si les numérateurs et les dénominateurs de ces fractions rationnelles sont de degré 1 en λ. Dans le cas contraire, il nous faut chercher les approximants de Hermite – Padé des séries $1, c_i(\tau), \lambda(\tau), \dots, \lambda(\tau)^j, \lambda(\tau)c_i(\tau), \dots, \lambda(\tau)^j c_i(\tau)$ pour un entier j suffisant. Notons que le degré j le plus élevé que nous avons rencontré jusqu'à présent est 2.

Ce groupe d'automorphismes généralise des notions bien connues en algèbre : groupe de Galois d'une extension algébrique, lorsque l'on a l'observabilité locale et non globale, ou groupe de Cremona lorsque l'extension $\mathcal{K}/k\langle U, Y\rangle$ est transcendante pure, comme c'est souvent le cas en pratique.

Références

[1] Beckermann, B., and Labahn, G. A uniform approach for hermite padé and simultaneous padé approximants and their matrix-type generalizations. *Numerical Algorithms 3* (1992), 45–54.

[2] Boulier, F., Lazard, D., Ollivier, F., and Petitot, M. Representation for the radical of a finitely generated differential ideal. In *Proceedings of ISSAC 1995* (Montreal, Canada, July 10–12 1995), A. H. M. Levelt, Ed., ACM, ACM Press, pp. 158–166.

[3] Braems, I., Jaulin, L., Keiffer, M., and Walter, É. Guaranteed numerical alternatives to structural identifiability testing. In *Proceedings of the 40th IEEE Conference on Decision and Control* (2001), pp. 3122–3127.

[4] Diop, S., and Fliess, M. On nonlinear observability. In *Proceedings of the first european control conference* vol. 1 (Grenoble, France, July 2–5 1991), C. Commault and coll., Eds., Hermès, pp. 152–157.

[5] Eisenbud, D. *Commutative algebra with a view toward algebraic geometry.* No. 150 in Grad. texts in Math. Springer, 1994.

[6] Goldbeter, A. A model for circadian oscillations in the Drosophila period protein. *Proceedings of the Royal Society London B*, 261 (1995), 319–324.

[7] Hermann, R., and Krener, A. Nonlinear controllability and observability. *IEEE Transactions on automatic control AC-22*, 5 (1977), 728–740.

[8] Johnson, J. Kähler differentials and differential algebra. *Annals of Mathematics 89*, 1 (1969), 92–98.

[9] Knuth, D. *The art of computer programming : seminumerical algorithms*, third ed., vol. 2. Addison–Wesley, 1998.

[10] Kolchin, E. *Differential algebra and algebraic groups.* Academic press, New York, 1973.

[11] Ljung, L., and Glad, T. Parametrization of nonlinear model structures as linear regressions. In *11th IFAC word congress* (Tellin, Estonia, Aug. 1990), pp. 67–71.

[12] Noiret, C. *Utilisation du calcul formel pour l'identifiabilité de modèles paramètriques et nouveaux algorithmes en estimation de paramètres.* Thèse de doctorat, Univ. Compiègne, déc. 2000.

[13] Ollivier, F., and Sedoglavic, A. A generalization of flatness to nonlinear systems of partial differential equations. application to the command of a flexible rod. In *Proceedings of the 5th IFAC Symposium "NOLCOS"* (Saint Petersburg, Russia, July 4–6 2001), vol. 1, Elsevier, pp. 196–200. Disponible à l'URL [18].

[14] Pohjanpalo, H. System identifiability based on the power series expansion of the solution. *Mathematical biosciences 41*, 1–2 (1978), 21–33.

[15] Raksanyi, A. *Utilisation du calcul formel pour l'étude des systèmes d'équations polynomiales (applications en modélisation).* Thèse de doctorat, Univ. Paris–Dauphine, 1986.

[16] Raksanyi, A., Lecourtier, Y., Walter, É., and Venot, A. Identifiability and distinguishability testing via computer algebra. *Mathematical biosciences 77*, 1–2 (1985), 245–266.

[17] Ritt, J. *Differential algebra*, vol. 33 of *American Mathematical Society colloqium publications.* Dover publications, 1950.

[18] Sedoglavic, A. http://medicis.polytechnique.fr/~sedoglav, *Page personnelle.* (sept. 2001).

[19] Sedoglavic, A. *Méthodes seminumériques en algèbre différentielle ; applications à l'étude des propriétés structurelles de systèmes différentiels algébriques en automatique.* Thèse de doctorat, École polytechnique, sept. 2001. Disponible à l'URL [18].

[20] Sedoglavic, A. A probabilistic algorithm to test local algebraic observability in polynomial time. In *Proceedings of ISSAC 2001* (London, Ontario, Canada, July 22–25 2001), B. Mourrain, Ed., ACM, ACM press, pp. 309–316. Disponible à l'URL [18].

[21] Vajda, S., Godfrey, K., and Rabitz, H. Similarity transformation approach to identifiability analysis of non linear comportemental models. *Mathematical biosciences 93*, 2 (1989), 217–248.